

VĚDECKÉ SPISY VYSOKÉHO UČENÍ TECHNICKÉHO V BRNĚ

Edice Habilitační a inaugurační spisy, sv. 175

ISSN 1213-418X

Pavel Šandera

**SOUČASNÝ STAV
A HISTORIE VÝPOČTŮ
TEORETICKÉ PEVNOSTI**

VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

Fakulta strojního inženýrství

Doc. RNDr. Pavel Šandera, CSc.

**SOUČASNÝ STAV A HISTORIE VÝPOČTŮ TEORETICKÉ
PEVNOSTI**

CALCULATIONS OF THEORETICAL STRENGTH:
STATE OF THE ART AND HISTORY

TEZE PŘEDNÁŠKY K PROFESORSKÉMU JMENOVACÍMU ŘÍZENÍ
V OBORU
„APLIKOVANÁ FYZIKA“



BRNO 2005

KLÍČOVÁ SLOVA

ideální krystal, teoretická pevnost, podmínky stability, elektronová struktura

KEY WORDS

ideal crystal, theoretical strength, stability conditions, electron structure

Obsah

1	TEORETICKÁ PEVNOST VE FYZICE PEVNÉ FÁZE A LOMOVÉ MECHANICE	5
2	SOUČASNÝ STAV ANALÝZY TEORETICKÉ PEVNOSTI.....	6
3	HISTORIE VÝPOČETNÍCH METOD	13
4	VLIV MŘÍŽKOVÝCH PORUCH, POVRCHOVÉ MIKRODRSNOSTI A TEPLoty.....	16
4.1	Bodové poruchy	17
4.2	Dislokace	17
4.3	Vrstevné chyby.....	17
4.4	Volný povrch a mikrodrsnost.....	18
4.5	Trhliny	18
4.6	Fonony (teplota)	18
5	TEORETICKÉ A EXPERIMENTÁLNÍ VÝSLEDKY	19
6	ZÁVĚR.....	21
7	LITERATURA	22

Doc. RNDr. Pavel Šandera, CSc. je absolventem Přírodovědecké fakulty Masarykovy univerzity v Brně se specializací fyzika pevných látek. Fakultu absolvoval s vyznamenáním a od roku 1978 nastoupil na místo asistenta na katedře fyziky Fakulty strojní VUT v Brně. Od té doby vede cvičení a přednášky v základním kurzu fyziky v prvním stupni magisterského studia a výuku řady předmětů ve studiu oborů Fyzikální inženýrství, Materiálové inženýrství i Konstrukční inženýrství, podílel se též na vydání řady učebních textů, je školitelem v doktorském studijním programu Fyzikální a materiálové inženýrství. V roce 2000 se habilitoval v oboru „Aplikovaná fyzika“.

Od roku 1992 je tajemníkem oborových rad magisterského studia Fyzikálního inženýrství a Přesné mechaniky a optiky, od roku 2002 je tajemníkem Rady studijních programů na FSI VUT, na fakultě též zajišťuje chod studijní evidence i každoroční přípravu studijních plánů všech oborů.

Zabývá se počítačovým modelováním procesů porušování pevných látek a fyzikální interpretací mechanických vlastností krystalů, kde využívá znalostí výpočetní techniky a numerické matematiky, zejména při konstruování mřížkových modelů krystalů pevných látek založených na různých typech párové i vícečásticové interakce. Aplikoval původní polynomický potenciál na výpočet ideální pevnosti při všesměrovém tahu, věnuje se nejen semiempirickým modelům, ale i ab initio výpočtům celkové energie pevné látky jako kvantově-mechanického systému a jejich změn v závislosti na deformaci. Kromě toho se zabývá vytvářením počítačových modelů šíření trhliny v korozním prostředí nebo modelováním odporu proti šíření trhliny ve vysocepevných ocelích a v keramických materiálech, kde se projevuje vliv stínění čela trhliny indukovaného interkrystalickým šířením trhliny. Vytvořené teoretické modely umožňují dosáhnout separace stínění od celkové hodnoty lomové houževnatosti a tak poskytují mnohem přesnější obraz o skutečné (inherentní) rezistenci materiálu vůči šíření trhlín. Přitom rozvinul pravděpodobnostní model interkrystalického porušování na čele trhliny.

Původní vědecké poznatky byly uplatněny v předních světových vědeckých časopisech, předneseny na významných pracovištích v zahraničí (včetně 62 příspěvků v zahraničních časopisech či na mezinárodních konferencích) a nacházejí odezvu v mezinárodní vědecké komunitě.

Ukázalo se, že výsledky dosažené při vytváření modelů sítě hranic mikroskopických zrn materiálu mají významný dopad i do oblasti submikroskopických zrn, a proto byly publikovány v sérii konferencí Nano. V roce 2002 se zapojil i do řídicí a organizační práce ve vznikající sekci Nanomateriály a nanotechnologie, kde je členem jejího řídicího výboru. Rozhodujícím způsobem je zapojen též do organizování mezinárodní vědecké konference „Struktura materiálů a mikromechanika lomu (MSMF)“ pravidelně pořádané na FSI VUT i dalších konferencí, které se pořádají na FSI VUT (Juniormat, Nano).

Od roku 1998 dosud je jako řešitel, spoluřešitel či odborný spolupracovník zapojen do řešení řady projektů (GAČR, COST, Infra-2) a též do úkolů výzkumného záměru VUT „Simulační modelování mechatronických soustav“.

1 TEORETICKÁ PEVNOST VE FYZICE PEVNÉ FÁZE A LOMOVÉ MECHANICE

Pevnost každé látky má horní limitu nazvanou teoretickou (ideální) pevností (TP). Tato hodnota odpovídá mechanické nestabilitě nekonečného bezporuchového monokrystalu při definovaném zátěžném módu. Reálná pevnost inženýrských materiálů je obvykle řízena nukleací a pohybem dislokací nebo mikrotrhlin. Pokud by tyto defekty nebyly přítomny, materiál by se porušil teprve v okamžiku dosažení TP. Dopusud se zatížením této velikosti přibližovala pouze namáhání ideálních monokrystalických vláken (whiskerů) čistých kovů nebo polovodičů v experimentálních podmínkách [1–3]. Již od začátku třetí dekády minulého století lze pozorovat víceméně nepřetržitou snahu fyziků získat teoretické i experimentální údaje o TP krystalů různých pevných látek. Množina hodnot TP tvoří horní mez únosných napětí dané pevné látky a její aplikační význam spočívá ve vymezení odstupu od horního pásma pevností nových inženýrských materiálů. To ovšem zdaleka není jediným důvodem výzkumu TP.

Z teoretického hlediska má TP rozhodující význam v základní teorii lomových procesů. Například napětí potřebné pro nukleaci dislokační smyčky lze ztotožnit s hodnotou smykové TP a lokální napětí pro iniciaci štěpné trhliny musí dosáhnout tahové TP [4–7]. Poměrem těchto hodnot lze popsat náchylnost krystalu ke křehkosti nebo tvárnosti [8–10]. Hodnoty TP jsou v poslední době užívány ke konstrukci nebo kalibraci semiempirických meziatomových potenciálů.

Z praktického hlediska lze říci, že smyková TP rozhoduje o počátku nukleace dislokací nebo lomu ve velmi tenkých vrstvách i v současnosti vyvíjených nanostrukturních materiálech. Nejnovější nanoindentační experimenty (např. [11–14]) dokumentují, že lokální skluz začíná nukleací dislokací v těch místech v okolí nanohrotu, kde skluzové napětí dosahuje smykové TP. V posledních letech začínají být whiskery používány jako výztužná fáze v kompozitních materiálech a rozměrné kovové nebo keramické monokrystaly se začínají používat jako konstrukční součásti, např. lopatky turbín [15].

Cílem tohoto pojednání je stručně nastínit jak historický vývoj, tak zejména současný stav problematiky výpočtů TP. Nejprve jsou uvedeny základní principy současných výpočtů TP při teplotě absolutní nuly ($T = 0$ K) a následně je připomenut historický vývoj metod výpočtu TP. Dále je diskutován vliv mřížkových poruch a teploty v souvislosti s problematikou experimentálního výzkumu TP. Vypočtené hodnoty TP krystalů prvků a vybraných sloučenin jsou srovnány s dostupnými experimentálními daty. Na závěr jsou zmíněny některé důležité otázky týkající se budoucnosti výzkumu TP.

2 SOUČASNÝ STAV ANALÝZY TEORETICKÉ PEVNOSTI

Uvažujme bezporuchový krystal rovnoměrně deformovaný v nelineárně elastické oblasti [16]. Celková vnitřní energie krystalu může být vyjádřena pomocí Voigtovy notace jako rozvoj

$$E = E_0 + V \sum_i \sigma_i \eta_i + \frac{1}{2} V \sum_i \sum_j C_{ij} \eta_i \eta_j + O(\eta^3), \quad i, j = 1, 2, \dots, 6, \quad (1)$$

kde σ_i jsou složky tenzoru napětí, η_i jsou složky Lagrangeova tenzoru deformace, C_{ij} jsou elastické moduly druhého řádu a V je objem krystalu. Jestliže položíme $E_0 = 0$ a užijeme vnitřní energii v jednotce objemu $E_u = E/V$, platí

$$C_{ij} = \frac{\partial^2 E_u}{\partial \eta_i \partial \eta_j}, \quad (2)$$

$$\sigma_i = \frac{\partial E_u}{\partial \eta_i}. \quad (3)$$

Jak bude diskutováno dále, závislost energie na deformaci může být stanovena pomocí empirických meziatomových potenciálů nebo výpočtem elektronové struktury. Pro libovolné zatížení je napjatost charakterizována šesti složkami tenzoru napětí a tudíž existuje nekonečné množství „teoretických pevností“ daného krystalu. Z praktických důvodů se však TP stanovuje pouze pro několik speciálních případů, které jsou plně definovány jedinou složkou tenzoru napětí. Jsou to jednoosý tah a tlak v různých krystalografických směrech, prostý smyk v určitých krystalografických systémech a hydrostatický tah a tlak. Jednotlivé TP postupně označené σ_{iut} , σ_{iuc} , τ_{is} , σ_{iht} a σ_{ihc} v rozumné míře pokrývají i nejdůležitější případy pevnostních charakteristik vyskytujících se v inženýrské praxi.

Pokud se nevyskytne žádná jiná nestabilita materiálu, jako např. fononová rezonance, fázová transformace nebo mechanická nestabilita, TP odpovídá prvnímu inflexnímu bodu na křivce energie vs. deformace. V souladu s druhým zákonem termodynamiky pro kvazistacionárně zatížený systém obecné podmínky stability vyžadují, aby volná energie (a při $T = 0$ také vnitřní energie) byla minimální [17–21]. Pokud je krystal infinitezimálně deformován tenzorem ε_{ij} z referenčního stavu spojeného s napětím σ_{ij} (ve standardní notaci), příslušné Cauchyho napětí t_{ij} může být vyjádřeno jako

$$t_{ij} = \sigma_{ij} + B_{ijkl} \varepsilon_{kl},$$

kde

$$B_{ijkl} = C_{ijkl} + \frac{1}{2} (\delta_{ik} \sigma_{jl} + \delta_{jk} \sigma_{il} + \delta_{il} \sigma_{jk} + \delta_{jl} \sigma_{ik} - 2\delta_{kl} \sigma_{ij}) \quad (4)$$

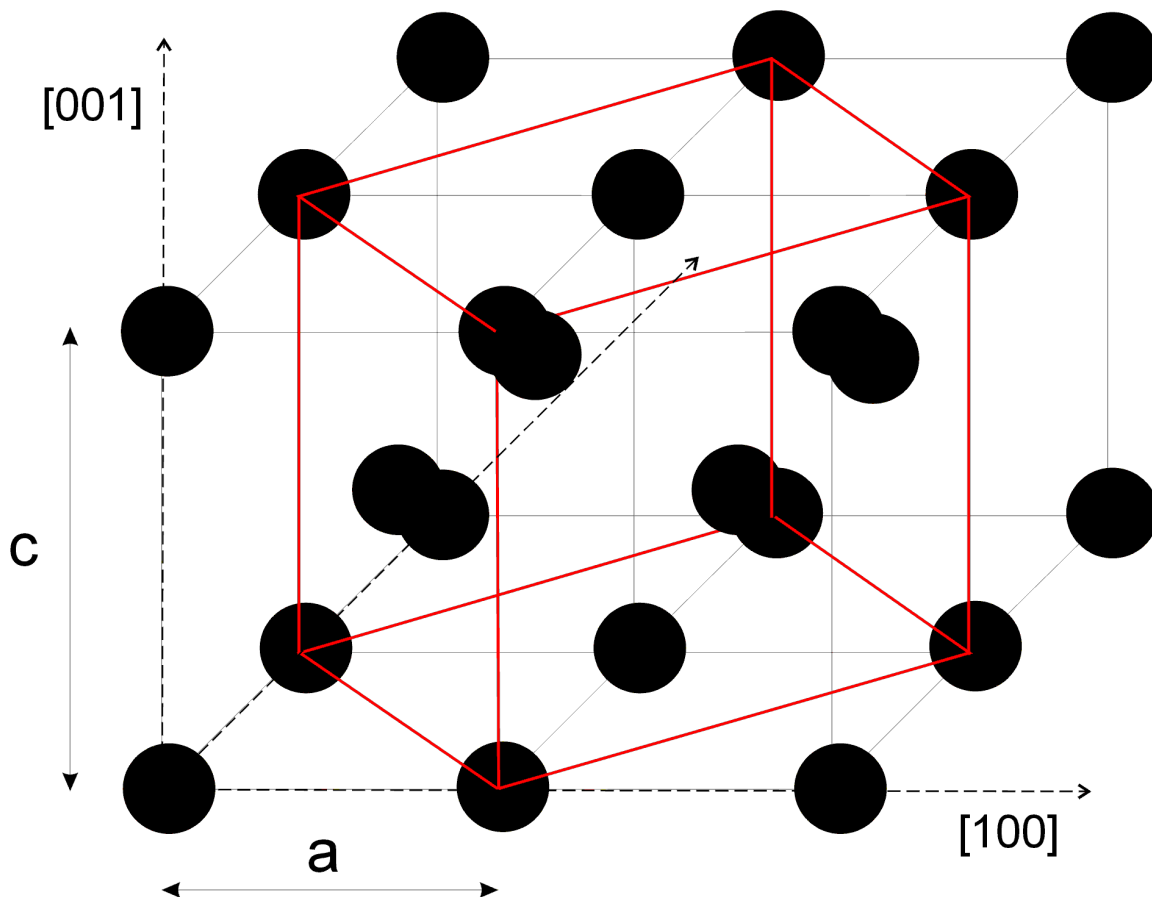
je matice tuhosti ($i, j, k, l = 1, 2, 3$), obecně asymetrická s ohledem na záměnu (ij) \leftrightarrow (ji). Sestavení této matice je podstatné pro hodnocení mechanické stability.

Jak ukázali Yip et al. [19], systém se stane v průběhu zatěžování nestabilní v okamžiku, kdy determinant jeho symetrizované matice

$$\|A\| = \frac{1}{2}(\|B\|^T + \|B\|) \quad (5)$$

je nulový, tj.

$$\det\|A\| = 0. \quad (6)$$



Obr. 1. Struktura fcc odpovídající poměru $c/a = \sqrt{2}$ podél Bainovy dráhy s počáteční bcc strukturou.

Zdůrazněme, že elastické moduly v rov. (4) jsou lokální, tj. odpovídají různým bodům deformační dráhy. K analýze nestability je tudíž nutné stanovit jejich hodnoty simulováním dostatečného počtu nezávislých malých odchylek z deformační dráhy v každém jejím bodě v souladu se symetrií dané krystalové mřížky. Řešení rov. (6) poskytuje různý počet podmínek stability pro různé mřížkové symetrie a různé zátěžné módy. Nejmenší počet nutných podmínek stability (pouze dvě) odpovídá izotropní pevné látce.

Podmínky stability kubických krystalů zatížených jednoosým tahem nebo tlakem ve směru [001] – tzv. Bainova dráha – mohou sloužit jako vhodný příklad (viz obr. 1). Pro tetragonální symetrii indukovanou jednoosým zatížením platí

$C_{11} = C_{22} \neq 0$, $C_{33} \neq 0$, $C_{12} \neq 0$, $C_{13} = C_{23} \neq 0$, $C_{44} = C_{55} \neq 0$, $C_{66} \neq 0$, a $C_{ij} = 0$ pro ostatní moduly. Pro tenzor napětí platí jednoduchý vztah $\sigma_{ij} = \sigma \delta_{i3} \delta_{j3}$. Dosazením těchto vztahů do rov. (6) získáme následující podmínky mechanické stability:

$$(C_{33} + \sigma)(C_{12} + C_{11}) - 2(C_{13} - \sigma/2)^2 > 0, \quad (7a)$$

$$C_{11} - C_{12} > 0, \quad (7b)$$

$$2C_{44} + \sigma > 0, \quad (7c)$$

$$C_{66} > 0. \quad (7d)$$

Levá strana první podmínky se liší od tetragonálního modulu $E_{[001]}$ pro nezatížený stav $\sigma = 0$ pouze násobnou konstantou. Proto nesplnění této podmínky musí být úzce souviset s prvním inflexním bodem na křivce energie deformace podél deformační dráhy [001]. Maximální hodnota napětí určující TP na dráze [001] ovšem vždy odpovídá inflexnímu bodu. To je hlavní důvod, proč se testování kritéria (7a) obvykle neprovádí. Všechny ostatní podmínky zabezpečují krystal před smykovými nestabilitami. Porušení podmínky (7b) způsobuje smykovou bifurkaci z tetragonální na ortorombickou deformační dráhu [22, 23]. V případě fcc krystalu indukuje tato nestabilita přechod k plošně středěné ortorombické dráze – tzv. Bornova nestabilita. Kritéria (7c) a (7d) se vztahují ke smykovým modulům C_{44} a C_{66} .

Při testování smykových kritérií je nutno podrobit krystal speciálním lokálním Lagrangeovým deformacím (určeným odpovídající Jacobiho maticí) v každém bodě deformační dráhy. Pro tetragonální dráhu odpovídající Jacobián [24]

$$J_{C'} = \begin{vmatrix} \sqrt{1+2e} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{1-2e} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}$$

a příslušná deformační matice

$$\eta_{C'} = \begin{vmatrix} e & 0 & 0 \\ 0 & -e & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

vedou k následující změně energie objemové jednotky systému podle rov. (1):

$$E_u = (C_{11} - C_{12})e^2 + \dots$$

Tetragonální smykový modul

$$C' = \frac{1}{2}(C_{11} - C_{12}) = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 E_u}{\partial e^2} \quad (8)$$

pak umožňuje testovat druhou podmínku stability. Užitím

$$J_{C_{44}} = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}}{2} & \frac{2e}{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}} \\ 0 & \frac{2e}{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}} & \frac{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}}{2} \end{vmatrix}, \quad \eta_{C_{44}} = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & e \\ 0 & e & 0 \end{vmatrix}$$

dostaneme

$$E_u = 2C_{44}e^2 + \dots$$

a

$$C_{44} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 E_u}{\partial e^2} \quad (9)$$

pro testování třetí podmínky.

Matice

$$J_{C_{66}} = \begin{vmatrix} \frac{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}}{2} & \frac{2e}{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}} & 0 \\ \frac{2e}{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}} & \frac{\sqrt{1+2e} + \sqrt{1-2e}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix}, \quad \eta_{C_{66}} = \begin{vmatrix} 0 & e & 0 \\ e & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

vedou na $E_u = 2C_{66}e^2 + \dots$ a $C_{66} = \frac{1}{4} \frac{\partial^2 E_u}{\partial e^2}$, což umožňuje analyzovat poslední smykové kritérium.

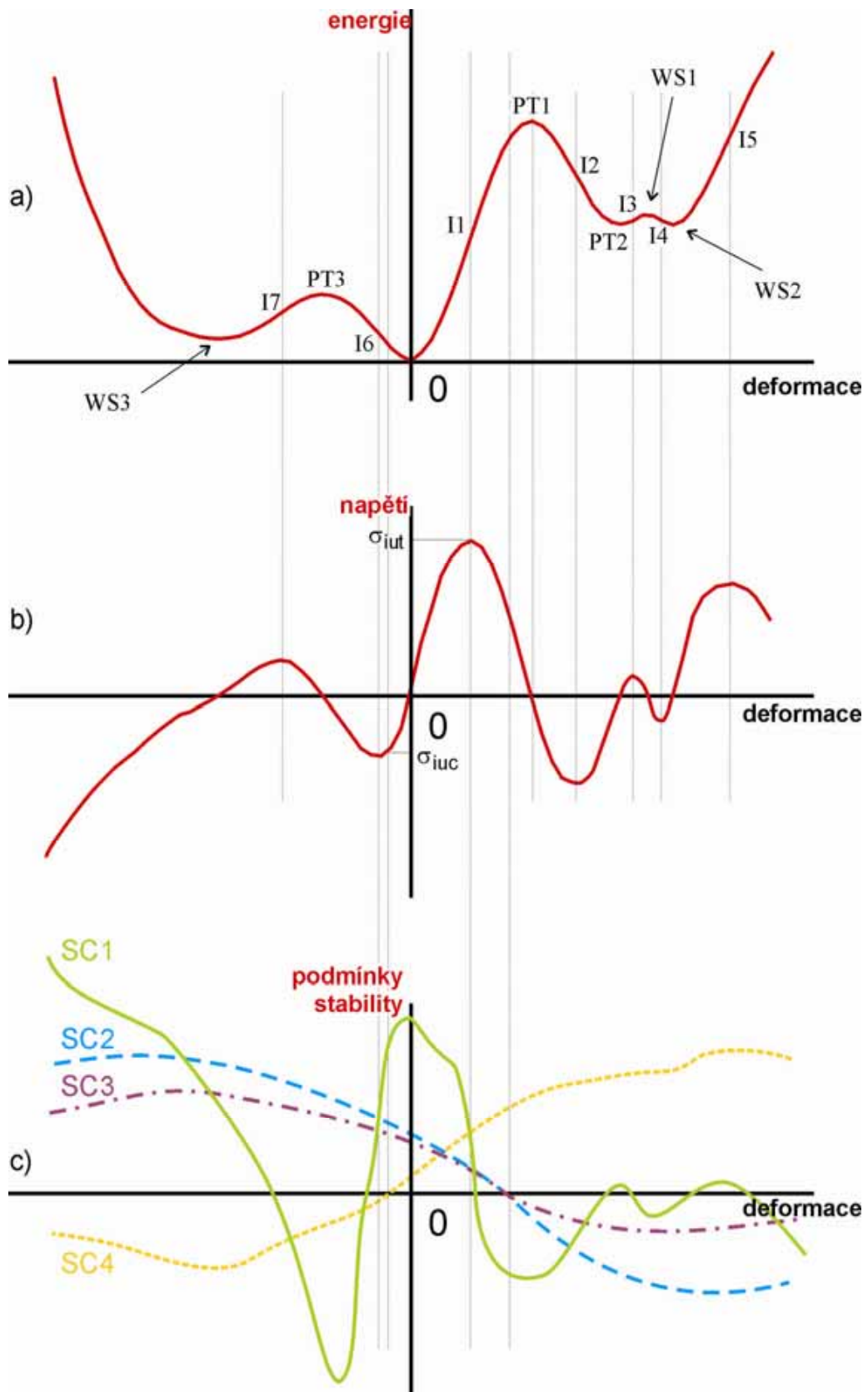
Při analýze deformace krystalu z hlediska TP mohou být obecně rozlišeny dva základní případy nestabilního chování:

- k nestabilitě dojde podél původní deformační dráhy,
- nestabilita mění zátěžný mód nebo typ deformační dráhy.

První typ nestability znamená, že proces nestabilního kolapsu krystalu začíná v inflexním bodě původní deformační dráhy. V případě posloupnosti stavů konstantního napětí (při řízeném napětí) začíná v tomto bodě spontánní desintegrace krystalu. V průběhu tohoto procesu se však mohou objevit deformačně indukované fázové transformace (displacive transformations) [25–27]. Tyto transformace, které se realizují kooperativními posuvy atomů z jejich mřížkových pozic, mění krystalovou symetrii, aniž by měnily atomové uspořádání nebo složení. Jsou prvního druhu a tedy provázeny extrémy na energiově-deformační křivce vynucenými symetrií. Např. podél tetragonální Bainovy dráhy s počáteční bcc strukturou (pokládánou za tetragonální s poměrem $c/a = 1$) dosáhneme prostorově středěné tetragonální struktury ($c/a > 1$) o nižší symetrii s jednou výjimkou. Pro $c/a = \sqrt{2}$ přejde struktura na fcc (obr. 1) a její vyšší symetrie vyvolá maximum na energiově-deformační křivce. Mohou se vyskytovat i další extrémy, které nejsou vynuceny symetrií a odrážejí speciální vlastnosti materiálů [28]. Na energiově-deformační křivce tedy může existovat více „virtuálních TP“ příslušných k různým inflexním bodům. **Skutečná hodnota TP je však definována prvním inflexním bodem na původní křivce energie-deformace odpovídajícím maximálnímu gradientu energie.** Všem dalším inflexním bodům předchází porušení přinejmenším jedné z podmínek stability. Nicméně atomové konfigurace příslušné lokálním minimům energie za prvním inflexním bodem mohou odpovídat stabilním nebo metastabilním atomovým seskupením, která lze identifikovat při studiu tenkých vrstev nebo rozsáhlých mřížkových defektů, jako jsou dislokace nebo fázová rozhraní [29]. Těchto konfigurací lze rovněž dosáhnout podél deformačně řízené deformační dráhy krystalu (posloupnost stavů konstantní deformace), pokud jim nepředchází žádná nestabilita druhého druhu.

Nestability druhého druhu se vyskytují před dosažením prvního inflexního bodu na původní křivce energie-deformace. Mění typ deformační dráhy (např. bifurkace z tetragonální na trigonální dráhu) nebo typ zátěžného módu. V tomto případě **TP odpovídá napětí v bodě, kde byla nejdříve porušena některá ze smykových podmínek nestability.** Všimněme si, že tato hodnota napětí je menší než napětí v inflexním bodě, i když stále odpovídá maximálnímu *dosažitelnému* gradientu energie.

Schéma závislosti energie vs. deformace obsahující všechny výše popsané nestability je ukázáno na obr. 2a spolu s příslušnou křivkou napětí-deformace (obr. 2b). Tato závislost odpovídá deformační dráze hypotetického krystalu při jednoosém tahu a tlaku. Průběhy hodnot levých stran relací čtyř podmínek stability SC1, SC2, SC3 a SC4 jsou vyneseny na obr. 2c.



Obr. 2. Schématické křivky pro virtuální krystal při jednoosém tahu-tlaku.
 a) energie-deformace, b) napětí-deformace, c) podmínky stability.

Před inflexním bodem I1 v tahové části zátěžné deformační dráhy se nevyskytují žádné nestability, jak je vidět z kladných hodnot všech křivek stability v tomto intervalu (viz obr. 2c). Křivka SC1 protíná osu pořadnic těsně za bodem I1. Napětí odpovídající bodu I1 je tedy maximální a určuje hodnotu σ_{iut} . Na původní tahové deformační dráze se dále vyskytují extrémy buď diktované symetrií (označené jako PT1 a PT2) nebo z jiných příčin (WS1 a WS2). Stavů krystalu PT1 však těsně předcházejí záporné hodnoty obou křivek SC2 a SC3 na obr. 2c. V průběhu deformace krystalu tedy tento stav nemůže být dosažen. Extrémy WS1 a WS3 jsou vynuceny buď existencí extrémů PT2, WS2 a PT3 nebo skutečností, že energie krystalu musí růst, pokud se meziatomová vzdálenost blíží nekonečnu nebo nule.

Prvnímu inflexnímu bodu I6 v tlakové oblasti předchází smyková nestabilita SC4. Hodnota σ_{iuc} je tudíž určena napětím v bodě průsečíku křivky SC4 s osou pořadnic. Za tímto bodem se krystal stává nestabilní a deformační dráha se mění na smykovou. V celém průběhu tahové-tlakové deformační dráhy se nevyskytují metastabilní TP, neboť inflexní body I3, I5 a I6 leží již uvnitř nestabilní oblasti po porušení smykových podmínek stability. Body I2, I4 a I7 souvisejí s opačným sklonem křivky energie-deformace s ohledem na směr tahu resp. tlaku a nemohou být tedy spojovány s hodnotami TP.

Spolu s porušením podmínek mechanické stability se podél deformační dráhy navíc mohou vyskytnout nestability fononové. V důsledku spojitosti mezi elastickými konstantami a sklonem větví akustických fononů v oblasti malých vlnových vektorů existuje přímá souvislost mezi mechanickými nestabilitami a měkkými fonony. Při jednoosé tahové deformaci buňky α -Fe [30] byl zjištěn typický měkký fonon přímo spojený s vymizením smykového modulu C_{44} , což implikuje existenci stacionární vlny přes celou buňku. Jiný měkký fonon, detekovaný v krátkovlnné oblasti, lze spojovat se smykovým posuvem atomů při přechodu z bcc do hcp struktury Burgersovým mechanismem. Nedávno byla objevena tlakově indukovaná fononová nestabilita při nízké teplotě v chloridu mědi, která vedla ke smykově řízené fázové transformaci [31]. Měkké fonony byly rovněž predikovány v krystalu hliníku při jednoosém tahovém a čistě smykovém namáhání [32]. Tlakově indukované fononové nestability při nízké teplotě byly studovány v chloridu mědi pomocí lineární teorie funkcionalů elektronové hustoty [31]. Bylo zjištěno, že při tlaku 2,6 GPa došlo k fázové transformaci CuCl z hexagonální wutzitové struktury do kubické sfaleritové struktury. Hnací silou této fázové transformace je zřejmě stínění necentrálních dalekodosahových sil potřebných ke stabilizaci krystalu vůči krátkovlnným smykovým distorzím. Z tohoto důvodu lze dedukovat na porušení některé smykové nestability, aniž by byla analýza mechanické stability prováděna.

Existují však jiné fononové nestability, které nelze spojit s mechanickou nestabilitou. Clatterbuck et al. [32] provedli ab initio výpočty fononového spektra jako funkce deformace pro jednoosý tah krystalu hliníku podél směrů [001], [110] a [111] a pro relaxovaný smyk $\langle 112 \rangle \{111\}$. Ve všech čtyřech případech bylo zjištěno, že fononové nestability určují TP hliníku. Jak již bylo uvedeno, TP je určena první ne-

stabilitou předcházející dosažení prvního inflexního bodu (porušení některé podmínky mechanické nestability, měkké módy fononů, magnetická spinová uspořádání atd. [20, 22, 24, 29, 33–36]). Nutnou a postačující podmínkou pro ocenění stability studovaného materiálu je však principiálně pouze analýza fononového spektra deformovaného krystalu v každém bodě deformační dráhy. Taková analýza je však extrémně obtížná a byla zřejmě dosud provedena pouze ve studii Clatterbucka et al. [32].

Současnou metodologii výpočtu TP můžeme tedy shrnout do následujících bodů:

- Konstrukce vhodného empirického meziatomového potenciálu nebo výpočet elektronové struktury.
- Výpočet křivky energie-deformace a související závislosti napětí vs. deformace pro danou deformační dráhu.
- Stanovení intervalů mechanické, nebo lépe fononové nestability na křivce napětí vs. deformace.
- Určení hodnoty TP jako napětí vztažené k prvnímu inflexnímu bodu nebo k prvnímu bodu nestability na křivce energie vs. deformace.

Připomeňme, že až do konce minulého století analýza obsažená v bodě 3 a částečně v bodě 4 nebyla obvykle prováděna. Téměř celá historie vývoje výpočtů TP tedy spadá do oblasti prvních dvou bodů.

3 HISTORIE VÝPOČETNÍCH METOD

První dobře známé odhady hodnot TP τ_{is} a σ_{iut} byly předloženy Frenkelem [37] a Orowanem [38]:

$$\tau_{is} = \frac{Gb}{2\pi h}, \quad (10)$$

$$\sigma_{iut} = \left(\frac{E\gamma}{a_0} \right)^{1/2}, \quad (11)$$

kde E a G jsou elastické moduly tahu a smyku, b je velikost Burgersova vektoru, h je vzdálenost mezi smykovými rovinami, γ je povrchová energie a a_0 je mřížková konstanta ve směru tahu. Oba vztahy mohou být snadno odvozeny z předpokladu *sinusového průběhu napětí-deformace*. Přestože je užito jednoduché párové interakce mezi atomy, oba vztahy poskytují velmi rozumný orientační odhad $\tau_{is} \approx G/10$ a $\sigma_{iut} \approx E/10$.

Za další milník může být považována Mackenzieho teorie [39], která používá první tři členy Fourierova rozvoje závislosti *energie na deformaci*. Jak však bylo ukázáno v práci Šandery a Pokludy [40], nebylo zde užito korektních fyzikálních předpokladů, což vedlo k příliš malým hodnotám TP ve smyku $\tau_{is} = G/30$ pro fcc krystal. Poněvadž se však tato hodnota zdála být již velmi blízko experimentálním výsledkům, byl přijat optimistický závěr spolu se změnou označení *teoretická* na

ideální pevnost [3, 39, 41]. Pozdější semiempirické i *ab initio* výpočty [40, 42] však potvrdily velmi dobrou platnost klasického odhadu (10). Z tohoto důvodu je v této práci preferován původní název „teoretická pevnost“, i když mnoho současných autorů již přešlo k názvu „ideální pevnost“.

V průběhu posledních 30 let bylo navrženo mnoho typů *empirických meziatomových potenciálů*, jako např. Johnson, Morse, Born-Mayer, Lennard-Jones, Stillinger-Weber, iontový, polynomický atd. Empirické parametry v těchto potenciálech byly kalibrovány experimentálními daty v okolí nezátíženého stavu krystalu, např. rovno-*vážným* mřížkovým parametrem a_0 , elastickými moduly C_{ij} a kohezní energií U_0 . Rozsáhlejší přehledy historie empirických přístupů k výpočtu TP lze nalézt např. v pracích [3, 41, 43].

V posledních 25 letech jsou často používány *semiempirické potenciály* konstruované na základě Finnisova a Sinclairova postupu [44] nebo metody vnořeného atomu [45]. Tyto potenciály jsou užívány pro modelování chování materiálů při velkých deformacích a pro popis rozsáhlých mřížkových poruch v krystalech slitin. Ve Finnisově a Sinclairově postupu je celková energie systému N atomů vyjádřena jako

$$E = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2} \sum_{j \neq i} V_{S_i S_j}(R_{ij}) - \sqrt{\rho_{S_i}} \right], \quad \rho_{S_i} = \Phi_{S_i}(S_1, R_{i,1}, S_2, R_{i,2}, \dots, S_j, R_{i,j}, \dots).$$

Indexy i a j jsou vztaženy k jednotlivým atomům a indexy S_i a S_j označují typ daného atomu. První člen je součet párových interakcí a druhý člen označuje vícečásticovou přitažlivou interakci. Vzdálenost R_{ij} mezi atomy je omezena poloměrem dosahu těchto potenciálů. Finnisův a Sinclairův potenciál, dobře reprodukuje hodnoty a_0 , c_{ij} , U_0 , energii vzniku vakance U_v stejně jako energii vrstevné chyby U_{sf} , byl již sestaven pro mnoho typů binárních slitin [46]. Potenciály na bázi metody vnořeného atomu umožňují přesné fitování k elastickým modulům třetího řádu C_{ijk} a poskytují rovněž rozumná fononová frekvenční spektra [47].

Analýzy TP založené na výpočtech elektronové struktury – tzv. *ab initio* (nebo *prvoprincipiální*) metody – se začaly objevovat po roce 1980. Tyto výpočty jsou prováděny na základě teorému funkcionálu hustoty [48, 49], v němž je problém víceelektronové interakce transformován do studia pohybu jediného elektronu v poli s efektivním potenciálem. To je popsáno Kohnovou-Shamovou rovnicí, která je formálně podobná Schrödingerově rovnici. V případě materiálů vykazujících krystalovou periodicitu mohou být jednoelektronové vlnové funkce rozvinuty do různých bázových funkcí vyhovujících Blochovu teorému.

Metody užívané ve výpočtech elektronové struktury mohou být kategorizovány vzhledem k výběru bazálních funkcí. Nejčastěji užívané báze jsou rozšířené rovinné vlny (augmented plane waves) a ortogonalizované rovinné vlny (orthogonalized plane waves), lineární orbitály (linear muffin-tin orbitals, LMTO), lineární kombinace atomových orbitalů (linear combination of atomic orbitals, LCAO), Gaussovské (Gaussian) a rozšířené (augmented) Slaterovy orbitály, rozšířené sférické vlny (augmented spherical waves) atd. Metoda Korringa-Kohna-Rostokera užívá Greeno-

vých funkcí Kohnovy-Shamovy rovnice a je tedy také nazývána metodou Greenových funkcí. Často je využívána i metoda pseudopotenciálu vhodná pro pevné látky neobsahující žádné elektrony typu d nebo f . Detailní popis těchto metod lze nalézt v mnoha knihách a člancích, např. [50–53].

Po vybrání vhodné báze je Kohnova-Shamova rovnice řešena iteračně k dosažení self-konzistence. To znamená, že elektronová hustota stanovená z efektivního jednoelektronového potenciálu musí vytvářet stejný efektivní potenciál (který je opět funkcí elektronové hustoty). Kvalita a rychlost konvergence takových výpočtů závisí nejen na výběru vhodné báze, nýbrž také na kvalitě iterační procedury. Z tohoto důvodu jsou jako rozumný vstup obvykle používány aproximace atomových potenciálů a vstupní a výstupní potenciály jsou vhodně směřovány před startem nové iterace. Atomové konfigurace odpovídající deformovaným strukturám mají obvykle nižší symetrie a v okolí TP jsou velmi daleko od rovnovážného nezatíženého stavu s nejnižší energií. Aby tedy byly získány spolehlivé energetické rozdíly, je zpravidla nutno použít tzv. plně potenciálových (full-potential) metod (tj. bez jakýchkoliv aproximací tvaru krystalového potenciálu nebo hustoty elektronového náboje). V současné době jsou k dispozici např. programové kódy WIEN, VASP, FHI, FLEUR, FPLO, FPLMTO, ABINIT, SIESTA.

První studie tahové TP z prvních principů byla publikována Espositem et al. [54], kteří vyšetřovali tahovou deformaci krystalu Cu. Tito autoři však neprováděli relaxaci rozměrů zatíženého krystalu ve směrech kolmých k ose namáhání (Poissonova expanze nebo kontrakce). Pravděpodobně první ab initio simulace tahové zkoušky se započtením poissonovské relaxace byla provedena Pricem et al. [55] pro jednoosý tah TiC podél osy [001]. Později byla Šobem et al. [56, 57] spočtena hodnota σ_{iut} pro tahové osy [001] a [111] mnoha kubických krystalů. Kitagawa a Ogata [58, 59] studovali tahovou TP krystalů Al a AlN, avšak bez zahrnutí Poissonovy kontrakce. Další výpočty hodnot σ_{iut} byly provedeny pro β -SiC [23], diamant [60], Si a Ge [61], Mo a Nb [35], a pro Si_3N_4 [62–64].

Skupina Šoba et al. stanovila hodnotu σ_{iut} pro krystal železa zatíženého jak v tahu ve směrech [001] a [111], tak hydrostatickým namáháním. Jak bylo diskutováno v pracích [65, 66, 36], nebyly zjištěny žádné magnetické nestability před dosažením inflexního bodu na křivce energie-prodloužení a spočtené hodnoty TP tudíž nejsou ovlivněny magnetickými efekty.

Poznamenejme, že většina prvoprincipiálních výpočtů TP vyšetřuje pouze pozici inflexního bodu na závislosti energie-deformace. V některých materiálech a při většině typů namáhání však může dojít k porušení některé podmínky mechanické stability ještě před dosažením inflexního bodu. To bylo ukázáno v případech jednoosého tahu [001] v krystalech Al [34], Nb [35] a Cu [24].

Smyková TP τ_{is} byla z prvních principů nejdříve spočtena Paxtonem et al. [42] pro krystaly V, Cr, Nb, Mo, W, Al, Cu, Ir a později i pro Mo [67] a Ta [68]). Tyto výpočty však nezahrnují žádné relaxace. V poslední době však byly spočteny relaxované hodnoty τ_{is} pro krystaly TiC, TiN a HfC [69], Mo a Nb [35], Si [70] a pro

Al, Cu a W [71]. Některé výpočty byly rovněž provedeny pro nanovlákná (amorfni Si [72], krystalický MoSe [73]), hranice zrn [74, 75] a fázová rozhraní [76, 77]. Skupina M. L. Cohena a J. W. Morrise, Jr. aj. spočítala hodnoty τ_{is} pro krystaly Al a Cu [78, 79], pro W [80, 81] a provedla také pečlivou teoretickou analýzu problematiky pevnosti a mechanické stability [22].

Od roku 1997 jsou prováděny výpočty TP při hydrostatickém tahu (tj. negativním hydrostatickém tlaku) ve skupině Pokludy et al. [82–84] i jiných autorů (např. [85]). Poněvadž se v tomto případě nemění symetrie kubických krystalů, lze využívat nejednodušších ab initio přístupů jako je aproximace atomových sfér (Atomic Sphere Approximation) v rámci metody lineárních orbitalů (tj. metoda LMTO-ASA). V této metodě aproximujeme potenciál souborem kulově symetrických (tzv. muffin-tin – MT) potenciálů uvnitř sfér kolem jednotlivých jader. Velikost těchto sfér je volena tak, aby jejich objem byl roven objemu odpovídajících Wignerových-Seitzových buněk. Intersticiální oblast (nenáležející žádné sféře) je zanedbána, stejně jako překryvy MT sfér.

Počínajíc rokem 1990 jsou prvoprincipiální metody výpočtu TP často kombinovány s pokročilými semiempirickými potenciály ke studiu rozsáhlých defektů v materiálech [86]. Důvodem této kombinace je skutečnost, že hodnoty a_0 , C_{ij} a C_{ijk} používané ke kalibraci semiempirických potenciálů charakterizují pouze nejbližší okolí (v podstatě infinitezimální okolí) nezátíženého rovnovážného stavu a hodnoty U_0 , U_v a U_{sf} mají integrální charakter. Hodnoty TP však typicky odpovídají 10–20% výchylce atomů z původních rovnovážných poloh a jejich správná reprodukce tedy může podstatně zlepšit přesnost semiempirických potenciálů. Navíc jsou prvoprincipiální metody schopny velmi přesně reprodukovat nelineární elastické chování reálných krystalů při vybraných jednoduchých deformačních drahách. Ab initio kalibrované semiempirické potenciály jsou tedy schopny dostatečně přesně predikovat mechanickou odezvu pevných látek v dostatečné vzdálenosti od nezátíženého rovnovážného stavu.

4 VLIV MŘÍŽKOVÝCH PORUCH, POVRCHOVÉ MIKRODRSNOSTI A TEPLoty

V reálných bezporuchových krystalech (whiskerech) jsou vždy přítomny některé strukturní a tvarové nedokonalosti, přinejmenším rovnovážná koncentrace vakancí a určitá úroveň povrchové mikrodrsnosti. Zdá se tedy korektní zmínit se o vlivu mřížkových poruch, povrchové drsnosti a teploty na hodnoty TP. Z principiálních důvodů ovšem nemůže být pevnost nedokonalých krystalů již nazývána teoretickou pevností. V tomto odstavci tedy budeme používat pouze termínu „pevnost“ namísto pojmu „teoretická pevnost“. Přítomnost mřížkových poruch obecně snižuje hodnoty pevnosti se vzácnou výjimkou speciálních příměsových atomů (viz dále). Poněvadž ve whiskerech nelze očekávat výskyt hranic zrn nebo subzrn, ani částic sekundární

fáze, budeme se zde zabývat pouze vlivem bodových poruch, dislokací, vrstevných chyb, volného povrchu, mikrovrubů, mikrotrhlin a fononů (teploty).

4.1 BODOVÉ PORUCHY

Ani v blízkosti nulové absolutní teploty nelze zamezit výskytu monovakancí v reálných krystalech. Jejich vliv na pevnost je však zanedbatelný. To lze snadno nahlédnout ze skutečnosti, že Orowanův vztah (11) pro TP v tahu je ekvivalentní Griffithovu kritériu pro nanotrhlínu atomových rozměrů – monovakancí. Velké shluky vakancí, které mohou být považovány za mikrotrhliny, sice mohou existovat při teplotách blízkých teplotě tání, avšak tento teplotní interval leží zcela mimo oblast zajímavou pro studium TP.

Vliv nečistot a průměrových atomů na pevnost byl studován v několika pracích založených na *ab initio* metodách. Godwin et al. [87] zjistil, že nečistoty Ge a As zvyšují kohezní energii hliníku až o 8 %, avšak pro změny pevnosti z této studie neplynou žádné jasné závěry. Huang et al. [88] uvádí, že dopanty p-typu nemají žádný vliv na tahovou pevnost krystalu křemíku, zatímco vysoké koncentrace dopantů n-typu mohou snížit pevnost až o 6 %. Obě uvedené práce využily pseudopotenciálního přístupu kombinovaného s molekulární dynamikou. Song aj. [89] použili metodu diskretních variací (DVM), aby zjistili, že 7 % příměs atomů V, Cr, Fe a Mo mírně zvyšuje hodnotu σ_{iht} , zatímco 4 % příměs způsobuje její mírné snížení. Mnoho autorů (např. [90]) teoreticky očekává mírné snížení smykové pevnosti τ_{is} vlivem průměrových atomů. Celkově lze říci, že vliv nízkých koncentrací bodových defektů na pevnost je velmi malý.

4.2 DISLOKACE

Dislokační skluz je možný při napětích větších než je Peierlsovo-Nabbarrovo napětí. Pokud je toto napětí malé, jako je tomu v kovech, pevnost může být dramaticky redukována (o 4 řády nebo i více). Na druhé straně v kovalentních keramických krystalech (C, Si, SiC, ZnS, Si₃N₄) je P-N napětí extrémně vysoké, stejně jako v komplexních iontových krystalech (MgAl₂O₄, Al₂O₃, Al₂O₃.MgO). To znamená, že dislokace jsou v okolí teploty absolutní nuly téměř nepohyblivé a pevnost může být redukována pouze o řádově desítky procent vlivem mikrotrhlin iniciovaných relaxací napětí u dislokací s velkým Burgersovým vektorem.

4.3 VRSTEVNÉ CHYBY

Pokud je nám známo, neexistují dosud žádné speciální studie týkající se vlivu vrstevné chyby na pevnost krystalů. Atomy v rovině stabilní vrstevné chyby leží v lokálním minimu energie a v jejich okolí tedy není indukováno žádné napětí. Energie vrstevných chyb přepočtená na jeden atom je asi o dva řády menší než energie volného povrchu. Z těchto důvodů lze dedukovat, že vliv vrstevných chyb na pevnost je zanedbatelná.

4.4 VOLNÝ POVRCH A MIKRODRSNOST

Vliv perfektně hladkého povrchu na pevnost může být rovněž pokládán za zanedbatelný. Avšak již nepatrné nedokonalosti povrchu, jako jsou mikrovrypy nebo mikrodůlky, působí jako koncentrátoři napětí (vruby). Jejich maximální vliv na hodnotu pevnosti může být odhadnut součinitelem $1 + 2(l/\rho)^{1/2}$, kde l je hloubka vrubu a ρ je křivost v kořeni vrubu ($\rho > 0$) [91]. Je tedy zřejmé, že ostré povrchové mikrovrubby mohou podstatně snížit hodnotu pevnosti.

4.5 TRHLINY

Podle Griffithova zákona pro ideálně křehké materiály snižuje atomárně ostrá trhlinka délky a hodnoty tahové nebo smykové pevnosti faktorem $(a/a_0)^{1/2}$ (a_0 je mřížkový parametr). Avšak pouze keramiky, polovodiče a z kovů s největší pravděpodobností pouze molybden a wolfram mohou být pokládány za inherentně křehké krystaly v okolí teploty absolutní nuly [92]. Ve všech ostatních kovech předchází procesu nestabilního šíření trhliny emise dislokací z jejího čela. Tato emise zvyšuje hodnotu efektivní povrchové energie a způsobuje otupení čela trhliny. Z těchto důvodů tedy pokles pevnosti musí být mnohem menší, než jak vyplývá z Griffithova zákona.

4.6 FONONY (TEPLOTA)

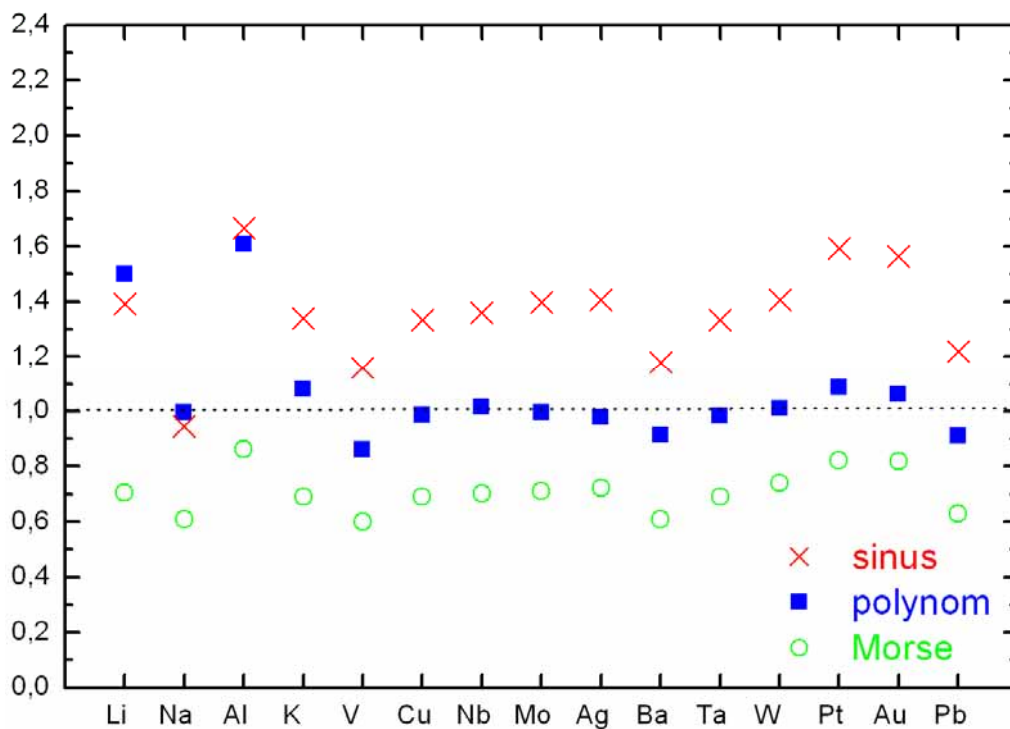
Změny pevnosti s teplotou souvisí s úlohou fononů v procesech deformace a lomu. Ačkoliv Frenkelův vztah (10) naznačuje, že změna smykové pevnosti by měla odpovídat teplotní změně smykového modulu, Orowanova relace (11) pro tahovou pevnost přináší komplikaci s teplotní závislostí povrchové energie. Z historického hlediska byly pro predikci teplotní závislosti pevnosti v podstatě užity dvě dostatečně relevantní metody – Einsteinův model harmonických oscilátorů kombinovaný s kritériem mechanické stability a model dislokační nukleace podporované fononovou fluktuací [3]. První z těchto přístupů předpovídá pokles jednoosé tahové pevnosti v intervalu od několika procent do desítek procent, měníme-li teplotu z 0 K do 1 000 K v závislosti na typu užitého empirického meziatomového potenciálu (krátkého nebo dlouhého dosahu). Tento pokles je ovšem velmi blízký předpokládaným změnám Youngova modulu. Druhý přístup počítá s maximální energií $50 kT$, kterou mohou poskytnout tepelné fluktuace při vysokých teplotách. Tyto výsledky typicky vedou k desetiprocentnímu poklesu pevnosti uvnitř výše uvedeného teplotního intervalu. Analýza možné tepelné iniciace trhliny ukázala, že poměrně malé hodnoty dostupné tepelné energie jsou nedostatečné k pravděpodobné realizaci tohoto procesu až do teplot 1 200 K (ve srovnání s transformací celkové deformační energie na energii povrchovou). Zdůrazněme však, že nejvíce fyzikálně odůvodněný přístup k problematice vlivu teploty na pevnost je komplexní analýza fononového spektra. Přesto můžeme pokládat teplotní změnu příslušného elastického modulu v prvním přiblížení za přijatelnou dolní mez vlivu teploty na pevnost ideálních krystalů.

5 TEORETICKÉ A EXPERIMENTÁLNÍ VÝSLEDKY

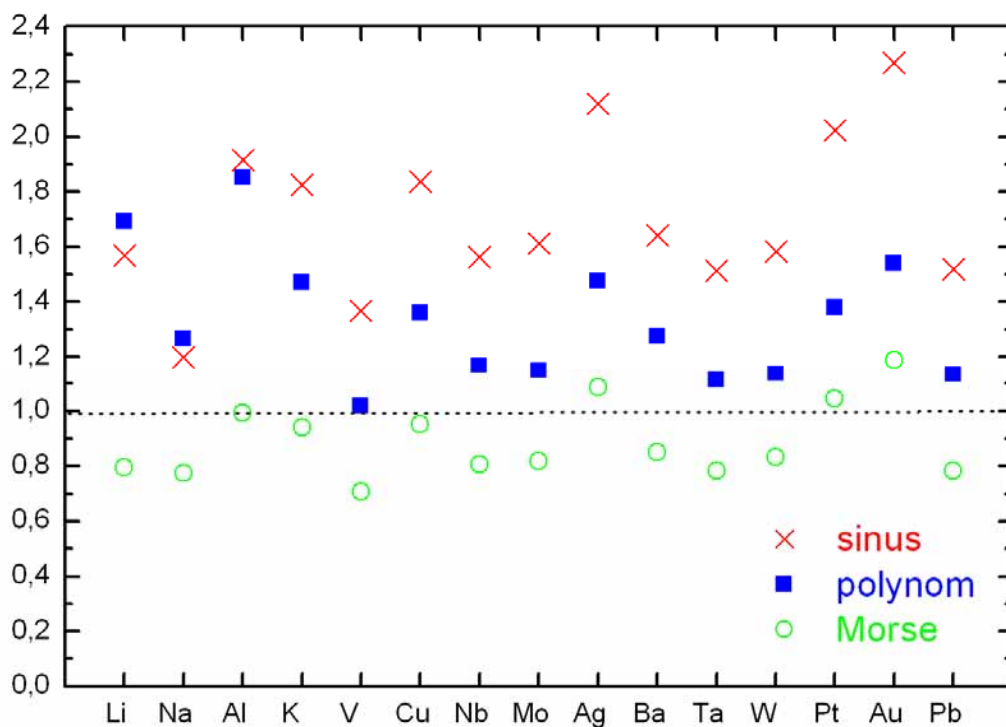
Vzhledem k dlouhé historii výpočtů TP existuje v literatuře velké množství teoretických výsledků týkajících se krystalů prvků i slitin. Počet experimentálních dat je však limitován, což je důsledkem značné obtížnosti experimentálního uspořádání. Zejména je obtížné měřit smykovou hodnotu τ_{is} a měření hydrostatické hodnoty zatím vůbec nebylo možno realizovat.

Vybrané teoretické a experimentální hodnoty jsou uvedeny v tabulce. Výběr byl proveden tak, aby bylo možno ukázat všechny základní typy krystalů – kovy, polovodiče, intermetalika, vzácné plyny, keramiky a polymery. Mezi nejvíce a nejméně pevným krystalem je rozdíl tří řádů v hodnotách TP. Jak lze očekávat, nejvyšší TP přísluší krystalu diamantu s čistě kovalentními vazbami a nejnižší hodnota TP odpovídá krystalům vzácných plynů, stabilních pouze při nízkých teplotách. Nejnižší hodnoty σ_{iut} pro daný krystal byly vždy nalezeny při ab initio výpočtech zahrnujících relaxaci s uvážením podmínek mechanické stability (např. hodnota 9,3 GPa pro krystal Cu). Rovněž nejnižší hodnoty τ_{is} byly získány za těchto podmínek, např. hodnota 2,7 GPa pro krystal Cu (hodnota 1,2 GPa byla zjištěna podle fyzikálně nerelevantní Mackenzieho teorie). V případě fcc krystalů je uvažována smyková rovina {111}, zatímco pro bcc krystaly rovina {112}. Je zřejmé, že teoretické a experimentální hodnoty se mohou podstatně lišit v závislosti na užitých metodách. Je proto obtížné provést obecné srovnání teoretických výpočtů. Většina hodnot σ_{iut} odpovídá inflexnímu bodu na křivce energie vs. deformace a je tudíž zřejmě nadhodnocena. Na druhé straně analýza mechanické stability provedená u kubických krystalů při hydrostatickém tahu ukázala, že ve většině případů nedošlo k porušení žádné podmínky smykové nestability před dosažením inflexního bodu [93]. Proto lze hodnoty σ_{iut} získané z prvních principů pokládat za rozumné odhady a lze tedy provést jejich srovnání s hodnotami získanými empiricky. To je ukázáno na obr. 3, odkud je zřejmé, že sinusový potenciál zpravidla nadhodnocuje TP, zatímco Morseova aproximace ji podhodnocuje. Výsledky dobře srovnatelné s ab initio výpočty užívajícími zjednodušenou aproximaci lokální elektronové hustoty (LDA – local density approximation) poskytuje polynomický potenciál (obr. 3a). Použití přesnější aproximace zobecněného gradientu hustoty (GGA – generalized gradient approximation) však ukazuje na určité nadhodnocení polynomickou aproximací (obr. 3b).

Většina experimentálních hodnot získaných na ideálních rozměrných monokrystalech nebo dokonce whiskerech je řádově menší než spočtená TP. To může být způsobeno dislokačně vyvolanou smykovou nestabilitou ovlivňující konečný lomový proces. Vysoké Peierlsovo-Nabarrovo napětí v kovalentních a iontových keramických krystalech (např. MgO nebo NaCl) však brání nukleaci a pohybu dislokací a zde je rozdíl mezi teorií a experimentem poměrně malý. Poznamenejme, že vůbec nejvyšší publikovaná experimentální hodnota $\sigma_{iut} = 40 \text{ GPa} \approx E/20$ přísluší whiskeru ZnO [41]. I experimenty prováděné Mikhailovskim et al. [94] na krystalech wolframu (s vysokým podílem kovalentních vazeb) se blíží vypočteným hodnotám [56].



a) aproximace lokální elektronové hustoty (LDA).



b) aproximace zobecněného gradientu hustoty (GGA)

Obr. 3 Porovnání hodnot TP v hydrostatickém tahu spočtených empirickými potenciály a prvoprincipiálními metodami.

Nesoulad mezi teorií a experimentem pro kovové krystaly se snížil, pokud se vezme v úvahu mechanická a fononová stabilita (např. pro Cu [24] a Al [32]), avšak přesto zůstává poměrně významný. Hodnoty maximálního skluzového napětí $\tau_{\max} \approx G/50$ v okamžiku lomu [41] jsou podstatně nižší než teoretické hodnoty $\tau_{is} \approx G/10$, ale již stejného řádu. Připomeňme, že nejnižší odhadnutá hodnota $\tau_{is} \approx G/30$ pro fcc mřížku a systém $\{111\}\langle 112\rangle$ je zatížena fyzikálně neopodstatněnými předpoklady. Z těchto důvodů je nutno rozdíly mezi teorií a experimentem chápat zejména z pohledu různých nedostatků experimentálního uspořádání, včetně vlivu zmíněných mřížkových poruch. Například je nutno zdůraznit, že podmínky mechanické stability vyžadují, aby zatěžovací zařízení bylo schopno udržet předepsané Cauchyho napětí a krystalovou symetrii podél celé deformační dráhy. To však zejména znamená, že pro případ jednoosého tahu [001] nemůže být podmínkami stability (7) kontrolována smyková nestabilita v systému $\{111\}\langle 112\rangle$. Právě tato nestabilita obvykle pozorovaná v experimentech totiž vyžaduje konečnou smykovou deformaci v rovině $\{111\}$, která mění symetrii na triklinickou nebo monoklinickou. Navíc může dojít k nestabilitě krátkovlnných fononů. Tyto efekty jsou zjevně za hranicemi možností mechanických podmínek nestability založených na mechanice kontinua.

V každém případě je třeba ještě vynaložit mnoho úsilí v teoretické a zvláště experimentální oblasti výzkumu TP. Na závěr poznamenejme, že např. současně používané ultrapevné oceli dosahují pouze desetiny předpokládané TP. Přitom tyto materiály s extrémní dislokační hustotou mohou principiálně dosahovat až poloviny hodnoty TP [5].

6 ZÁVĚR

Užitím prvoprincipiálních výpočtů na bázi elektronové struktury bylo dosaženo významného pokroku při stanovování hodnot TP. Predikce mechanických charakteristik ideálních krystalů těmito metodami umožňují rovněž konstruovat velmi spolehlivé a efektivní meziatomové potenciály, které mohou být aplikovány k analýze složitých problémů fyziky, deformace a lomu na atomární úrovni. Nejlepší dokumentací této skutečnosti je úspěch semiempirických meziatomových potenciálů s podporou ab initio, jak ukázaly studie rozsáhlých mřížkových poruch, jako jsou hranice zrn nebo metastabilní fáze. Hodnoty TP vypočtené z prvních principů jsou rozumnými napětíovými parametry charakterizujícími mechanický stav krystalu v blízkosti jeho nestability.

V blízké budoucnosti zůstávají pro odborníky pracující v oblasti fyziky deformace a lomu z teoretického hlediska nejvýznamnější výzvou následující problémy: *i)* konstrukce ab initio podporovaných semiempirických potenciálů, *ii)* široká aplikace a zpřesnění podmínek stability *iii)* prvoprincipiální výpočty TP. Na druhé straně je zřejmé, že teorie byla dosud nedostatečně podpořena experimentálními výsledky. V tomto smyslu se zdají velmi slibnými nanoindentační experimenty, přinejmen-

ším pro testování smykové TP. Pozitivně může působit i vzrůstající užívání whiskerů a monokrystalů v moderních kompozitních materiálech a strojních komponentách. Lze doufat, že technologický vývoj umožní provádět nejenom sofistikované nanoindentační zkoušky, nýbrž také další tahové testy whiskerů a zejména rozměrných ideálních krystalů na téměř perfektních zkušebních zařízeních. V těchto experimentech lze spatřovat jeden z kritických bodů nejen pro vývoj výzkumu TP, nýbrž i pro celou fyziku deformace a lomu.

7 LITERATURA

- [1] Brenner, S. S.: J. Appl. Phys. 27, (1956) 1484.
- [2] Nadgorny, E. M.: Sov. Phys. Uspekhi 5 (1962) 462.
- [3] Kelly, A. – Macmillan N. H.: Strong Solids. Clarendon Press, Oxford, 1986.
- [4] Jokl, M. L. – Vitek, V. – McMahon, C. J. Jr.: Acta Metallurgica 28 (1980) 147.
- [5] Kroupa, F.: In „Prediction of Mechanical Properties of Metallic Materials by means of Structural Characteristics“. Eds. J. Pokluda and P. Staněk. VÚ070 Brno, 1981, p. 32
- [6] Thomson, R.: Solid State Physics 39 (1986) 1.
- [7] Huang, H. – Gerberich, W. W.: Acta Metall. Mater. 40, 2873 (1992).
- [8] Kelly, A. – Tyson, W. R. – Cottrell, A. H.: Phil. Mag. 15 (1967) 567.
- [9] Pokluda, J. – Šandera, P.: Phys. Stat. Solidi 167b (1991) 543.
- [10] Pokluda, J. – Šandera, P.: Key Eng. Mater. 97–98 (1994) 467.
- [11] Bahr, D. F. – Kramer, D. E. – Gerberich W. W.: Acta Mater. 46 (1998) 3605.
- [12] Woodcock, C. L. – Bahr, D. F.: Scripta Mater. 43 (2000) 783.
- [13] Gouldstone, A. – Koh, H. J. – Zeng, K. Y. – Giannakopoulos, A. E. – Suresh, S.: Acta Mater. 48 (2000) 2277.
- [14] de la Fuente, O. R. – Zimmerman, J. A. – Gonzales, M. A. – de la Figuera J. – Hamilton, J. C. – Pai, W. W. – Rojo, J. M.: Phys. Rev. Lett. 88 (2002) 036101.
- [15] Goldschmidt, D.: In „Materials for Advanced Power Engineering“ 1994, Eds. D. Coutsouradis et al. Part I. Dordrecht, Kluwer Academic Publishers 1994, p. 661.
- [16] Wallace, D. C., ed.: Thermodynamics of Crystals. John Wiley & Sons, New York-London-Sydney-Toronto 1972.
- [17] Wang, J. – Li, J. – Yip, S. – Phillpot, S. R. – Wolf, D.: Phys. Rev. B 52 (1995) 627.
- [18] Zhou, Z. – Joós, B.: Phys. Rev. B 54 (1996) 3841.
- [19] Yip, S. – Li, J. – Tang, M. – Wang, J.: Mater. Sci. Eng. A317 (2001) 236.
- [20] Hill, R. – Milstein, F.: Phys. Rev. B (1977) 3087.
- [21] Milstein, F. – Rasky, D. J.: Phys. Rev. B 54 (1996) 7016.
- [22] Morris, J. W. – Krenn, C. R.: Phil. Mag. A 80 (2000) 2827.
- [23] Li, W. – Wang, T.: Phys. Rev. B59 (1999) 3993.

- [24] Černý, M. – Šob, M. – Pokluda, J. – Šandera, P.: *J. Phys. Cond. Matter* 16 (2004) 1045.
- [25] Craievich, P. J. – Weinert, M. – Sanchez, J. M. – Watson, R. E.: *Phys. Rev. Lett.* 72 (1994) 3076.
- [26] Šob, M. – Wang, L. G. – Vitek, V., *Comp. Mat. Sci.* 8 (1997) 100.
- [27] Paidar, V. – Wang, L. G. – Šob, M. – Vitek, V.: *Modelling Simul. Mater. Sci.* 7 (1999) 369.
- [28] Šob, M. – Friák, M. – Wang, L. G. – Vitek, V.: In „Multiscale Modelling of Materials“, eds. V. V. Bulatov, T. Diaz de la Rubia, R. Phillips, E. Kaxiras, N. Ghoniem, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc. Vol. 538*, Materials Research Society, Warrendale, PA, 1999, pp. 523–527.
- [29] Šob, M. – Friák, M. – Legut, D. – Vitek, V.: In: *3rd Int. Alloy Conf. An Interdisciplinary Approach to the Science of Alloys in Metals, Minerals*, eds. P. E. A. Turchi and A. Gonis, Kluwer, Boston-Dordrecht-London, 2003, p. 57.
- [30] Shibutani, Y. – Krasko, G. L. – Šob, M. – Yip, S.: *Mater. Sci. Res. Int.* 5 (1999) 225.
- [31] Ma, Y. – Tse, J. S. – Klug, D. D.: *Phys. Rev. B* 67 (2003) 140301.
- [32] Clatterbuck, D. M. – Krenn, C. R. – Cohen, M. L. – Morris, J. W. Jr.: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 135501.
- [33] van Vliet, K. J. – Li, J. – Zhu, T. – Yip, S. – Suresh, S.: *Phys. Rev. B* 67 (2003) 104105.
- [34] Li, W. – Wang, T.: *J. Phys. Cond. Matter* 10 (1998) 9889.
- [35] Luo, W. – Roundy, D. – Cohen, M. L. – Morris, J. W. Jr.: *Phys. Rev. B* 66 (2002) 094110.
- [36] Clatterbuck, D. M. – Chrzan, D. C. – Morris, J. W. Jr.: *Acta Mater.* 51 (2003) 2271.
- [37] Frenkel, J.: *Z. Phys.*, 37 (1926) 572.
- [38] Orowan, E.: *Rep. Progr. Phys.*, 12 (1949) 185.
- [39] Kelly, A.: *Strong Solids*. Clarendon Press, Oxford 1973.
- [40] Šandera, P. – Pokluda, J.: *Scr. Metall. Mater.* 29 (1993) 1445.
- [41] Macmillan, N. H.: In „Atomistics of Fracture.“ Eds. Latanision R. M. and Pickens J. R., Plenum Press, New York 1983, p. 95.
- [42] Paxton, A. T. – Gumbsch, P. – Methfessel, M.: *Phil. Mag. Lett.* 63 (1991) 267.
- [43] Šandera, P. – Pokluda, J.: *Metall. Mater.* 32 (1994) 180.
- [44] Finnis, M. W. – Sinclair, J. E.: *Phil. Mag. A*, 50 (1984) 45.
- [45] Daw, M. S. – Baskes, M. I.: *Phys. Rev. B* 29 (1984) 6443.
- [46] Luzzi, D. E. – Yan, M. – Šob, M. – Vitek, V.: *Phys. Rev. Lett.* 67 (1991) 1894.
- [47] Chantasiriwan, S. – Milstein, F.: *Phys. Rev. B* 67, 14081 (1996).
- [48] Hohenberg, P. – Kohn, W.: *Phys. Rev.* 136 (1964) B864.
- [49] Kohn, W. – Sham, L. J.: *Phys. Rev.* 140 (1965) A1133.
- [50] Singh, D. J.: *Planewaves, Pseudopotentials and the LAPW Method*, Kluwer Academic Publishers, Boston-Dordrecht-London, 1994.

- [51] Blaha, P. – Schwarz, K. – Luitz, J.: A Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Package for Calculating Crystal Properties. Vienna University of Technology, Vienna 1997.
- [52] Turek, I. – Drchal, V. – Kudrnovský, J. – Šob, M. – Weinberger, P.: Electronic Structure of Disordered Alloys, Surfaces and Interfaces. Kluwer, Boston 1997.
- [53] Springborg, M.: Methods of Electronic-Structure Calculations, J. Wiley, Chichester – New York, 2000.
- [54] Esposito, E. – Carlson, A. E. – Ling, B. D. – Ehrenreich, H. – Gelatt, C. D. Jr.: Phil. Mag. A41 (1980) 251.
- [55] Price, D. L. – Cooper, B. R. – Wills, J. M.: Phys. Rev. B 46 (1992) 11368.
- [56] Šob, M. – Wang, L. G. – Vitek, V.: Mat. Sci. Eng. A 234–236 (1997) 1075.
- [57] Šob, M. – Wang, L. G. – Vitek, V.: Metall. Mater. 36 (1998) 145.
- [58] Kitagawa, H. – Ogata, S.: Key Eng. Mater. 161–163 (1999) 443.
- [59] Ogata, S. – Kitagawa, H.: Comp. Mat. Sci. 15 (1999) 435.
- [60] Telling, R. H. – Pickard, C. J. – Payne, M. C. – Field, J. E.: Phys. Rev. Lett. 84 (2000) 5160.
- [61] Roundy, D. – Cohen, M. L.: Phys. Rev. B 64 (2001) 212103.
- [62] Ogata, S. – Hirosaki, N. – Kocer, C. – Kitagawa, H.: Phys. Rev. B 64 (2001) 172102.
- [63] Ogata, S. – Hirosaki, N. – Kocer, C. – Shibutani, Y.: J. Mater. Res. 18 (2003) 1168.
- [64] Kocer, C. – Hirosaki, N. – Ogata, S.: Phys. Rev. B 67 (2003) 035210.
- [65] Friák, M. – Šob, M. – Vitek, V.: In „Juniormat '01“, Brno University of Technology, Brno 2001, pp. 117–120.
- [66] Friák, M. – Šob, M. – Vitek, V.: Phil. Mag. A 83 (2003) 3529.
- [67] Xu, W. – Moriarty, J. A.: Phys. Rev. B 54 (1996) 6941.
- [68] Söderlind, P. – Moriarty, J. A.: Phys. Rev. B 57 (1998) 10340.
- [69] Jhi, S. H. – Louie, S. G. – Cohen, M. L. – Morris, J. W. Jr.: Phys. Rev. Lett. 87 (2001) 075503.
- [70] Umeno, Y. – Kitamura, T.: Mat. Sci. Eng. B 88 (2002) 79.
- [71] Ogata, S. – Li, J. – Yip, S.: Science 298 (2002) 807.
- [72] Galli, G. – Gygi, F. – Catellani, A.: Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 3476.
- [73] Ribeiro, F. J. – Roundy, D. J. – Cohen, M. L.: Phys. Rev. B 65 (2002) 153401.
- [74] Kohyama, M.: Mat Sci. Forum 294–296 (1999) 657.
- [75] Kitamura, T. – Umeno, Y.: Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 11 (2003) 127.
- [76] Batirev, I. G. – Alavi, A. – Finnis, M. W. – Deutsch, T.: Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 1510.
- [77] Tanaka, S. – Yang, R. – Kohyama, M.: In „Proc. Int. Symp. on Micro-Mech. Eng., – Heat Transfer, Fluid Dynamics, Reliability and Mechanotronics (ISMME2003, Tsuchiura and Tsukuba, Japan)“, The Japan Soc. Mech., Tokyo 2003, B26-053.
- [78] Roundy, D. – Krenn, C. R. – Cohen, M. L. – Morris, J. W. Jr.: Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 2713.

- [79] Roundy, D. – Krenn, C. R. – Morris, J. W. Jr. – Cohen, M. L.: *Mat. Sci. Eng. A* 317 (2001) 44.
- [80] Roundy, D. – Krenn, C. R. – Morris, J. W. Jr. – Cohen, M. L.: *Mat. Sci. Eng. A* 319–321 (2001) 111.
- [81] Roundy, D. – Krenn, C. R. – Cohen, M. L. – Morris, J. W. Jr.: *Phil. Mag. A* 81 (2001) 1725.
- [82] Šandera, P. – Pokluda, J. – Wang, L. G. – Šob, M.: *Mater. Sci. Eng. A* 234–236 (1997) 370.
- [83] Černý, M. – Šandera, P. – Pokluda, J.: *Czech. J. Phys.* B49 (1999) 1495.
- [84] Černý, M. – Pokluda, J. – Šandera, P. – Šob, M.: *Phys. Rev. B* 67 (2003) 035116.
- [85] Son, Y. – Yang, R.: *Phys. Rev.* B59 (1999) 14220.
- [86] Yan, M. – Šob, M. – Luzzi, D. E. – Vitek, V. – Ackland, G. J. – Methfessel, M. – Rodriguez, C. O.: *Phys. Rev. B* 47 (1993) 5571.
- [87] Goodwin, L. – Needs, R. – Heine, V.: *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988) 2050.
- [88] Huang, Y. M. – Spence, J. C. H. – Sankey, O. F.: *Phil. Mag.* 70 (1994) 53.
- [89] Song, Y. – Xu, D. S. – Yang, R. – Li, D. – Wu, W. T. – Guo, Z. X.: *Mater. Sci. Eng. A* 260 (1999) 269.
- [90] Haydock, R.: *J. Phys.* 14C (1981) 3807.
- [91] Neuber, H.: *Kerbspannungslehre*. Springer Verlag, Berlin 1958.
- [92] Pokluda, J. – Kroupa, F. – Obdržálek, L.: *Mechanical Properties and Structure of Solids*. PC Dir, Brno 1994.
- [93] Černý, M. – Pokluda, J.: *Journal Alloys Comp.* 378 (2004) 159.
- [94] Mikhailovskii, I. M. – Poltinin, I. Y. – Fedorova, L. I.: *Sov. Phys. Solid State* 23 (1981) 757.
- [95] Verma, M. V. – Verma, A. – Rathere, R. P. S.: *Acta Phys. Pol.* A93 (1998), 479.
- [96] Černý, M. – Pokluda, J. – Šandera, P.: *Mat. Sci. Eng.* A387–A389 (2004), 923.
- [97] Šob, M. – Friák, M. – Legut, D. – Fiala, J. – Vitek, V.: *Mat. Sci. Eng.* A387–A389 (2004), 148.
- [98] Morris, J. W. Jr. – Krenn, D. – Roundy, D. – Cohen, M. L.: In: „2000 Hume-Rothery Symp. in honor of A. G. Khatchaturyan“, eds. Turchi, P. E. and Gonis, A., TMS, Warrendale, PA, 2000 pp. 187–207.
- [99] Adams, J. B. – Foiles, S. M.: *Phys. Rev. B* 41 (1990) 3316.

Tab. 1. Vypočtené a měřené hodnoty teoretické pevnosti

Krystal	mřížka	trojosá TP	jednoosá TP		smyková TP	
		[GPa]	[GPa]		[GPa]	
		teorie	teorie	experiment	teorie	experiment
Na	bcc	2,0 A 1,5 A [21] 1,2 E [43]	0,04<100>E [41] 0,2 <110>E [41] 0,9 <111>E [41]		0,21<111>E 0,20<111>A	
Si	dia	20,5 A [82] 25,0 E [43]	22,4<100>E [41] 47,3<111>E [41] 24,8<111>A [95]	4,14 [41] 7,60 [41]	13,7<100>E 14,7<110>E	
C	dia	54,0 A [83] 138 E [43]	168<100>E [41] 205<111>E [41] 90<111>A [60] 95<111>A [61] 130<100>A [60]	20,7(grafit) [41] 19,6(grafit) [3]	131<110>E	
Cu	fcc	29,0 A [82] 19,9 E [43]	41 <100>E [54] 39 <111>E [41] 31 <110>A 29 <111>A [57] 9,3<100>A	1,25 <111> [3] 2,94 <111> [41] 1,50 <100> [41] 1,74 <100> [41] 1,59 <110> [41]	1,2 <112> E 2,9 <112> E 4,0 <112> A 2,7 <112> A	0,80<011> [3]
Fe	bcc	42,5 A [84] 24,1 E [43] 21,5 E [43]	48,0<111>E [43] 30,0<100>E [43] 13 <001>A	13,1 <111> [3]	7,3 <111> E 6,6 <111> E 11,5 <111> E	3,56<111>
Ti	bcc		9,5 <100>E			
W	bcc	53,1 A [85] 56,8 A [82] 42,2 E [43]	61<100>E [43] 29,5<100>A [81] 54,3<110>A [56] 40,1<111>A [56]	24,7<100> [41]	18,2 <111> E 18,1 <111> A	
Pb	fcc	8,47 A [83] 5,47 E [43]			0,47 <112> E	
Ar	fcc	0,25 E [41] 0,15 E [43]	0,35<100>E [43] 0,35<111>E [43]		0,14 <110> E 0,08 <112> E	
TiC	B1		44<001>A			
NaCl	B1	4,3 E [41] 3,4 E [43]	4,6<111>E [43] 12,4<110>E [41] 4,3<100>E [41]	1,08 <100> [41]	3,2 <110> E 2,3 <112> E	
MgO	B1	8,5 E [43]	37<100>E	23,7 [41]	32,0 <110> E	
Ni ₃ Al		28,1 A [96]	17,5<100>A 28<111>A			
β-Si ₃ N ₄	P6 ₃ m		57 <100> E [44]	13,5 <100> [41] 14 <100> [3]		
Polyeth.			26 E [3]	3,04 [41]		
Kevlar				2,8-3,6 [3]		

A – ab initio, E – empirické

ABSTRACT

Current state and historical evolution of theoretical strength calculations is presented as a brief overview completed by a database of selected theoretical and experimental results. Besides the definition of the theoretical strength, the importance of the dependence of the total energy vs. deformation for its determination is elucidated. Principles of a sophisticated analysis of mechanical stability of crystals are explained by means of a schematic example. Related stability conditions and Jacobian matrixes are presented for the tetragonal deformation path of cubic crystals. References are given also to other crystalline symmetries and deformation paths. Moreover, more general stability conditions based on the phonon spectra analysis are also briefly discussed. The importance of these analyses for understanding the micromechanics of fracture is shown on the background of the influence of crystal defects and temperature. A brief overview of the history of theoretical strength calculations is presented with an emphasis to *ab initio* methods based on calculations of the electronic structure. Differences between theoretical and experimental values of the theoretical strength are discussed in terms of possible imperfections of both the calculation methods and the experimental procedures. Finally, some challenging tasks concerning the investigation of the theoretical strength are outlined for the near future.